6.1

Vi skal her beregne energien som må til for å eksitere et elektron fra $n=1$ til $n=2$ tilstanden i hydrogenatomet. Vi har ifølge likning (6.3)

$$\Delta E_{1\to 2} = hcR\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{2^2}\right) = \frac{3}{4}hcR$$

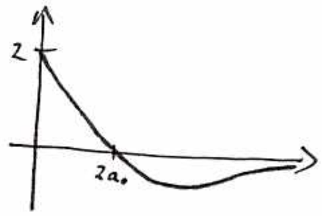
der Plank's konstant $h = 6{,}626\cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}$, lyshastigheten $c = 2{,}998\cdot 10^{8}\,\mathrm{m/s}$, Rydbergkonstanten $R = 1{,}097\cdot 10^{7}\,\mathrm{m}^{-1}$ og $1\,\mathrm{J} = \frac{1\,\mathrm{eV}}{1{,}602\cdot 10^{-19}}$. Vi får ved innsetting $\underline{\Delta E_{1\to 2} = 10{,}2\,\mathrm{eV}}$.

Bemerk: $hcR = 13{,}60\,\mathrm{eV}$ (se worked problem 6.1)

6.2

Den radielle 2s-bølgefunksjonen R_{2s} er gitt i tabell 6.1 som

$$R_{2s}(r) = \left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}$$



Deriverer og setter lik null:

$$R_{2s}'(r) = -\frac{1}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}} + \left(2-\frac{r}{a_0}\right)\left(-\frac{1}{2a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$= -\frac{1}{2a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\left[2+\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\right] = -\frac{1}{2a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\left(4-\frac{r}{a_0}\right) \overset{!}{=} 0$$

Da $e^{-\frac{r}{2a_0}} > 0$ for alle r må $r = 4a_0$. Vi ser at funksjonen $R_{2s}(r)$ er positiv for $r < 2a_0$ og negativ for $r > 2a_0$. $R_{2s}(r)$ må m.a.o. ha et minimum for $r = 4a_0$

Bemerk: Vi kan bytte ut $R_{2s}(r)$ med f.eks. $-R_{2s}(r)$ uten å forandre dens fysiske betydning. Denne vil ha et minimum for $r=0$ og et maksimum for $r = 4a_0$!

6.3 Den radielle delen av 3p bølgefunksjonen er gitt i tabell 6.1

$$R_{3p}(r) = \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

a) R_{3p} har noder (nullpkt.) for $\underline{\underline{r = 0}}$ og $\underline{\underline{r = 6a_0}}$

b) Deriverer og setter lik null

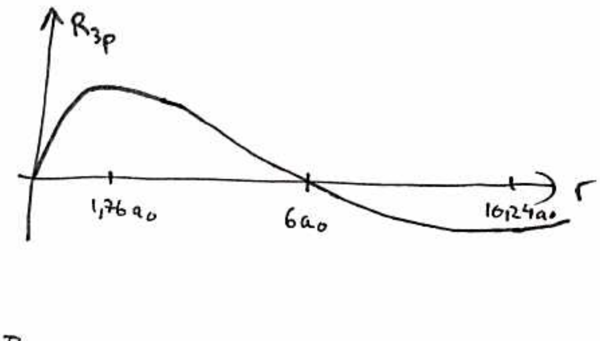
$$R_{3p}'(r) = \left(\frac{6}{a_0} - \frac{2r}{a_0^2}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}} + \left(6 - \frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}\left(-\frac{1}{3a_0}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

$$= e^{-\frac{r}{3a_0}} \left[\frac{6}{a_0} - \frac{2r}{a_0} - \frac{2r}{a_0} + \frac{r^2}{3a_0^2} \right]$$

$$= \frac{e^{-\frac{r}{3a_0}}}{3a_0^2} \left[r^2 - 12a_0 r + 18a_0^2 \right] \stackrel{!}{=} 0$$

gir $r = 6a_0 \pm 3\sqrt{2}\, a_0$ (hhv. $1,76a_0$ og $10,24a_0$). Da $R_{3p}(r) > 0$ for $r < 6a_0$ og $R_{3p}(r) < 0$ for $r > 6a_0$ har $R_{3p}(r)$ $\underline{\underline{\text{maksimum for } r = 6a_0 - 3\sqrt{2}\, a_0}}$.

c) $\underline{\underline{\text{Minimum for } r = 0 \text{ og } r = 6a_0 + 3\sqrt{2}\, a_0}}$



Bemerk: Kan også her bytte ut $R_{3p}(r)$ med $-R_{3p}(r)$.

$\boxed{6.4}$ Vi skal her bestemme ved hvilken avstand fra hydrogenatomets kjerne det er mest sannsynlig å finne et 2s-elektron. Kvadratet av den radielle 2s-bølgefunksjonen er et uttrykk for sannsynlighetstettheten til elektronet. Multipliserer vi denne med arealet av en sirkelflate, $4\pi r^2$, får vi sannsynlighetstettheten som funksjon av avstanden

$$P_{2s}(r) = R_{2s}(r)^2 \cdot 4\pi r^2 = 4\pi r^2 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0}$$

Deriverer og setter lik null

$$P_{2s}'(r) = 4\pi \left[2r\left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 + r^2\left(-\frac{2}{a_0}\right)\left(2 - \frac{r}{a_0}\right) + r^2\left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2\left(-\frac{1}{a_0}\right) \right] e^{-r/a_0}$$

$$= 4\pi r \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/a_0} \left[2\left(2 - \frac{r}{a_0}\right) - \frac{2r}{a_0} - \frac{r}{a_0}\left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \right]$$

$$= 4\pi r \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/a_0} \left[4 - \frac{6r}{a_0} + \frac{r^2}{a_0^2} \right] \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \underbrace{r = 0, \; r = 2a_0}_{\text{minimum}}, \; \underbrace{r = 3a_0 \pm \sqrt{5}\, a_0}_{\text{maximum}} \quad (\text{hhv. } 0{,}76\, a_0 \text{ og } 5{,}24\, a_0)$$

Ved innsetting gir $\underline{\underline{r = 3a_0 + \sqrt{5}\, a_0}}$ størst verdi, og det er m.a.o. størst sannsynlighet for å finne et elektron i denne avstanden

$\boxed{6.5}$ Vi skal her beregne den gjennomsnittlige avstanden mellom kjernen og et 1s-elektron. Sannsynlighetstettheten til et 1s-elektron som funksjon av avstanden er gitt ved likning (6.26)

$$P(r) = 4\pi r^2 N^2 \cdot e^{-2r/a_0}$$

der normaliseringskonstanten N er gitt ved likning (6.28)

$$N = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$$

Dette gir

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r P(r)\, dr = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} dr$$

$$\boxed{\int_0^\infty x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}}$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \cdot \frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^4} = \frac{4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot a_0^4}{2^4 \cdot a_0^3} = \frac{3}{2} a_0$$

Mao. gjennomsnittlig avstand mellom kjernen og elektronet er $\underline{\underline{\langle r \rangle = \frac{3}{2} a_0}}$.

$\boxed{6.6}$ Vi skal her vise at

$$R(r) = N r \cdot e^{-r/2a_0}$$

er en løsning av likning (6.16)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2 R(r)} \frac{d}{dr}\left[r^2 \frac{dR(r)}{dr}\right] + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \ell(\ell+1) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = E$$

gitt $\ell = 1$. Beregner først

$$\frac{d}{dr}\left[r^2 \frac{dR(r)}{dr}\right] = \frac{d}{dr}\left[r^2 N \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}\right]$$

$$= N\left[2r\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) - \frac{r^2}{2a_0} - \frac{r^2}{2a_0}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)\right] e^{-r/2a_0}$$

$$= N r e^{-r/2a_0}\left[2 - 2\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{4a_0^2}\right]$$

$$= \left(2 - 2\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{4a_0^2}\right) R(r)$$

Setter inn i likning (6.16) og får $(\ell = 1)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left(2 - 2\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{4a_0^2}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \cdot 2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$= \frac{\hbar^2}{\mu a_0 r} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{\hbar^2}{8\mu a_0^2} \overset{!}{=} E$$

Benytter likning (6.5) for Bohr radiusen

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \implies \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = \frac{\hbar^2}{m_e a_0}$$

og får

$$\frac{\hbar^2}{\mu a_0 r} - \frac{Z\hbar^2}{m_e a_0 r} - \frac{\hbar^2}{8\mu a_0^2} \overset{!}{=} E$$

$\boxed{6.6 \text{ forts.}}$

For at $R(r)$ skal være en løsning må E være en konstant, hvilket kun stemmer hvis vi setter $Z = 1$ og $\mu = m_e$. Da $\mu = \frac{m_e \cdot Z m_u}{m_e + Z m_u} \approx m_e$ stemmer dette tilnærmingsvis for hydrogenatomet.
(Protonmassen $m_u = 1{,}674 \cdot 10^{-27}$ kg og elektronmassen $m_e = 9{,}109 \cdot 10^{-31}$ kg, eller $m_u \approx 1838 m_e \Rightarrow \mu = 0{,}9995 m_e$).

$\boxed{6.7}$ $2p_z$-orbitalen til hydrogenatomet er gitt som

$$\psi_{2p_z} = z \cdot R_{2p}(r) \overset{\boxed{\text{tabell 6.1}}}{=} z \cdot \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

Langs z-aksen vil $r = z$:

$$\psi_{2p_z}(z) = \frac{z^2}{a_0} \cdot e^{-\frac{z}{2a_0}}$$

Sannsynlighetstettheten langs z-aksen blir derfor

$$P_{2p_z}(z) = \psi_{2p_z}(z)^2 = \frac{z^4}{a_0^2} e^{-\frac{z}{a_0}}$$

Deriverer og setter lik null

$$\left(4 \frac{z^3}{a_0^2} - \frac{z^4}{a_0^3}\right) e^{-z/a_0} \overset{!}{=} 0$$

gir $z = 0$ eller $z = 4a_0$ som er hhv. minima og maksima.

Mao. er det langs z-aksen størst sannsynlighet for å observere elektronet i en avstand $\underline{\underline{z = 4a_0}}$ fra kjernen.

$\boxed{6.8}$ I en av de eksiterte tilstandene til hydrogenatomet er det totale angulære momentet $L = \sqrt{2}\,\hbar$, ingen komponent langs z-aksen $M_z = 0$ og ioniseringsenergi 3,4 eV.

Ved relasjonen $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar \overset{!}{=} \sqrt{2}\,\hbar \Rightarrow \ell = 1$

og ved
$$M_z = m_\ell \hbar \overset{!}{=} 0 \qquad \Rightarrow m_\ell = 0$$

Finner hovedkvantetallet n ved

$$\frac{hcR}{n^2} \overset{!}{=} 3{,}4\,\text{eV} \qquad \Rightarrow n = 2$$

$hcR = 13{,}60\,\text{eV}$. Mao. er elektronet i en $\underline{\underline{2p_z\text{-tilstand}}}$.

$n=2$ $\ell=1$ $m_\ell=0$

6.9

D-orbitalene som tilsvarer kvantetallene $n=3$, $\ell=2$ og $m_\ell=\pm 1$ har følgende bølgefunksjon

$$\psi_{3d\pm} = R_{3d}(r)\cdot \sin\theta\cos\theta\cdot e^{\pm i\varphi}$$

der $R_{3d}(r)$ gitt ved tabell 6.1 (har valgt å sette $Z=1$)

$$R_{3d}(r) = \frac{r^2}{a_0^2}\, e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

Da $e^{\pm i\varphi} = \cos\varphi \pm i\sin\varphi$ kan vi lage to reelle linearkombinasjoner av $\psi_{3d\pm}$

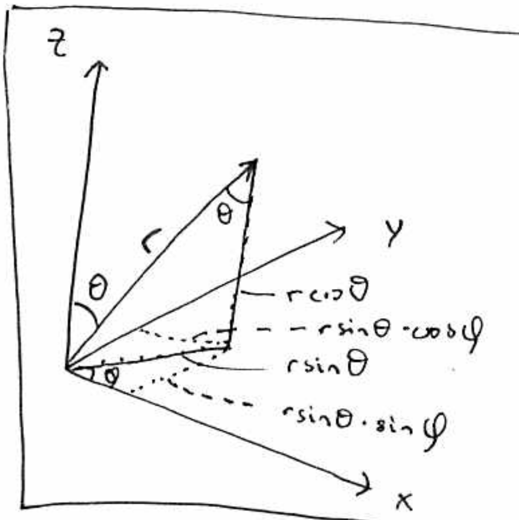
$$\psi_1 = N_1(\psi_{3d+} + \psi_{3d-}) = N_1 R(r)\sin\theta\cos\theta\cdot 2\cos\varphi$$

$$\psi_2 = -N_2 i(\psi_{3d+} - \psi_{3d-}) = N_2 R(r)\sin\theta\cos\theta\cdot 2\sin\varphi$$

der N_1 og N_2 er vilkårlige konstanter. Setter for enkelhetsskyld $N_1 = N_2 = \frac{1}{2}$ og setter inn utrykket for $R_{3d}(r)$

$$\psi_1 = \frac{e^{-\frac{r}{3a_0}}}{a_0^2}\, r^2\sin\theta\cos\theta\cos\varphi = \frac{xz}{a_0^2}\, e^{-\frac{r}{3a_0}} = \psi_{3d_{xz}}$$

$$\psi_2 = \frac{e^{-\frac{r}{3a_0}}}{a_0^2}\, r^2\sin\theta\cos\theta\sin\varphi = \frac{yz}{a_0^2}\, e^{-\frac{r}{3a_0}} = \psi_{3d_{yz}}$$



Ser av figuren at

$$z = r\cos\theta$$

$$x = r\sin\theta\cos\varphi$$

$$y = r\sin\theta\sin\varphi$$